



<b>Evento</b>	Salão UFRGS 2014: SIC - XXVI SALÃO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA DA UFRGS
<b>Ano</b>	2014
<b>Local</b>	Porto Alegre
<b>Título</b>	SÍNTESE, CARACTERIZAÇÃO ESTRUTURAL DO COMPLEXO Ni ( II), CONTENDO LIGANTE TRIDENTADO PIRROL-IMINA E USO NA DIMERIZAÇÃO DO ETILENO
<b>Autor</b>	HALANA KRISTINE DA CAS
<b>Orientador</b>	OSVALDO DE LAZARO CASAGRANDE JUNIOR

As  $\alpha$ -olefinas lineares são usadas como intermediários para a produção de uma vasta gama de produtos, como, por exemplo, polietileno de baixa densidade, detergentes, lubrificantes sintéticos e plastificantes. Neste contexto, o desenvolvimento de novos catalisadores capazes de oligomerizar o etileno visando à produção seletiva de  $\alpha$ -olefinas tem tido atenção especial nas últimas décadas, devido a sua importância em uma variedade de processos industriais. Para este propósito, várias classes de catalisadores contendo diferentes metais de transição têm sido desenvolvidas. Entre estas, a baseada em complexos de níquel encontra-se entre as mais importantes. Em geral, catalisadores de Ni(II) tendem a favorecer a terminação da cadeia sobre a propagação, explicando seu uso em vários processos para dimerização de  $\alpha$ -olefinas. Neste trabalho reporta-se a síntese do pré-catalisador de Ni(II) contendo ligante tridentado pirrol-imina e aplicação deste na dimerização do etileno. O pré-ligante de estrutura (L<sup>1</sup>)H<sub>2</sub> foi preparado com rendimento de 60 % pela reação de condensação da base de Schiff envolvendo uma amina primária com o pirrol-2-carboxaldeído em etanol a 65 °C por 72 horas sem a necessidade da presença de um ácido como catalisador. O complexo de Ni(II) foi preparado pela reação do sal do ligante Na(L<sup>1</sup>H) com 1 equiv. de [NiCl<sub>2</sub>(DME)] em THF por 24 horas a temperatura ambiente, promovendo a formação do complexo [NiCl(L<sup>1</sup>H)](**Ni1**) como sólido marrom em bom rendimento (73%). Este complexo mostrou moderada solubilidade em solventes orgânicos hidrocarbonetos de baixa polaridade tais como tolueno e benzeno, e solubilidade em solventes polares como CH<sub>2</sub>Cl<sub>2</sub>, THF e acetonitrila. Monocristais adequados de **Ni1** para determinação da estrutura por difração de raios X foram obtidos através da difusão lenta de éter em uma solução de **Ni1** em acetonitrila a temperatura ambiente. O complexo **Ni1** é monomérico no estado sólido com coordenação  $\kappa^3$ -NNN do ligante pirrol-imina frente ao átomo de níquel (II), com o centro do níquel apresentando geometria quadrado planar levemente distorcida, indicada pelos ângulos de ligação, N1-Ni-N10 e N7-Ni-Cl1, isto é, 168,77(6) e 179,04 (5) respectivamente, os quais são desviados de 180°. Os comprimentos de ligação Ni1-N1(pirrol) e Ni1-N7(imina) [1,8715(14) Å e 1,8585(14) Å, respectivamente] são próximos, e similares a complexos de Ni tridentados pirrol-imina já descritos na literatura (1,888(5) Å) e menores que complexos de Ni contendo ligantes pirrol-imina bidentados [Ni-N(pirrol) = 1,952(2) Å; Ni-N(imina) = 1,982(2) Å]. Sob condições reacionais já estabelecidas em nosso grupo de pesquisa (toluene, 30°C, [Al]/[Ni] = 250, MAO, 20 bar de etileno) **Ni1** mostrou-se ativo na oligomerização do etileno com frequência de rotação (FR) de 14.900 h<sup>-1</sup> com seletividade para a produção de buteno-1 de 69,3%.